



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Técnicas Computacionales Avanzadas / [Advanced Computational Techniques](#)

### 1.1. Código / Course number

31236

### 1.2. Materia / Content area

Módulo 4. Aspectos avanzados / [Module 4. Advanced aspects](#)

### 1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / Year

2º / [2<sup>nd</sup>](#)

### 1.6. Semestre / Semester

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

6 créditos ECTS / [6 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente / [Lecturer](#): Giovanni Granucci  
Universidad de Pisa / [University of Pisa](#)

Docente / [Lecturer](#): Filippo De Angelis  
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente / [Lecturer](#): Edoardo Mosconi  
Institute of Molecular Science and Technologies (ISTM-CNR)

Docente / [Lecturer](#): Stefano Evangelisti  
Universidad Toulouse III Paul Sabatier / [University Toulouse III Paul Sabatier](#)

Docente / [Lecturer](#): Dimitrios Skouteris  
Scuola Normale Superiore

Docente / [Lecturer](#): Stefano Pasqua  
Università degli studi di Perugia/ [University of Perugia](#)

Docente / [Lecturer](#): Alessandro Moriconi  
Università degli studi di Perugia/ [University of Perugia](#)

## 1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

- Plantear o reconocer la ecuación de Schödinger de sistemas modelo en presencia de condiciones externas para plantear su resolución con medios informáticos.
- Saber utilizar redes de computo de altas prestaciones en Red Deslocalizada (Grid o similares).
- Conocer al menos una biblioteca (“library”) de rutinas de cálculo numérico paralelo usando algún problema como referencia (por ejemplo, sistemas magnéticos).



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### 1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

#### **BÁSICAS Y GENERALES**

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

#### **TRANSVERSALES**

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

#### **ESPECÍFICAS**

CE22 - Conoce la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### 1.11a. Learning objectives

- Either set up or recognize the Schrödinger equation for model systems in the presence of external conditions so that their resolution can be planned using computational media.
- To know how to use network-based High Performance Computation (HPC) facilities such as Grid or similar techniques.
- To know about some library of parallel computing routines and how to apply them to some kind of particular problems (e.g., magnetic systems)

### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

#### **BASIC AND GENERAL SKILLS**

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

### SPECIFIC SKILLS

CE22 - Students know the existence of advanced computational techniques such as instruction and data channeling, superscalar and multiscalar processors, chain operations, parallel platforms, etc.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

-- Aprender sobre el método Hartree (MCTDH) para resolver problemas dinámicos cuánticos dependientes del tiempo

-- Centrarse en las transiciones entre diferentes estados electrónicos que ocurren sin absorción o emisión de fotones ("transiciones sin radiación")

-- Aprender a procesar la realización de Objetos de Aprendizaje Digitales

-- To learn about the multi-configurational time-dependent Hartree (MCTDH) method for resolving time-dependent quantum dynamics problems

--- To focus on the transitions between different electronic states that occur without absorption or emission of photons ("radiationless transitions")

-- To learn to process of realization of Digital Learning Objects

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Se informará sobre el material de consulta para todas las asignaturas con la suficiente antelación en la página web del Curso Intensivo.

The consultation material for all the subjects will be informed in advance on the website of the Intensive Course.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Clases en aula de informática:** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
 Código: 31236  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 6 ECTS

**Seminarios.** En ellos se discutirán los resultados obtenidos en los trabajos propuestos y las dudas sobre las metodologías empleadas.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

**Classes in computer science classroom:** Teaching will be taught in a computer classroom. The classes, in two-hour sessions, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will explain the basic concepts and practical applications, and a practical part, in which the student will learn through the resolution of practical cases.

**Seminars:** The Professor and the students will discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

**Tutoring sessions:** The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

**Presencial:**

Clases teóricas..... 32 horas  
 Tutorías..... 10 horas

**No Presencial:**

Estudio autónomo individual o en grupo..... 50 horas  
 Preparación de seminarios..... 23 horas  
 Elaboración de una memoria sobre resultados experimentales..... 35 horas

TOTAL (6 ECTS \* 25 horas/ECTS)..... 150 horas

**Contact hours:**

Theoretical lessons..... 32 hours



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

Tutoring sessions..... 10 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study ..... 50 hours  
Preparation of seminars, assigned tasks and study..... 23 hours  
Elaboration of a memory based on experimental results..... 35 hours  
TOTAL (6 ECTS \* 25 hours/ECTS)..... 150 hours

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

La nota final de la asignatura se basará en

- 60% realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.
- 40% discusión en tutorías y/o seminarios sobre los ejercicios, trabajos o prácticas realizados en la asignatura.

The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.
- 40% Discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars about the exercises proposed in class.

#### 5. Cronograma / Course calendar

La edición número 13 del Curso Intensivo del Máster en Química Teórica y Modelización Computacional tendrá lugar en la Università degli Studi di Perugia (Italia) del 3 al 28 de septiembre de 2018.

Información del curso, conferencias y horario en:  
<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>

The 13<sup>th</sup> edition of the Intensive Course of the Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling will be organized at the Università degli Studi di Perugia (Italy) from 3<sup>rd</sup> to 28<sup>th</sup> September 2018.

Further information of the Intensive Course, lectures, schedule on:

Curso 2018-2019



Asignatura: Técnicas Computacionales Avanzadas  
Código: 31236  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

<http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2//TCCM2018/EM-TCCM2018/EM-TCCM/Welcome.html>